

# 特許協力条約

発信人 日本国特許庁 (国際調査機関)

代理人

酒井 宏明

様

あて名

〒100-6019

日本国東京都千代田区霞が関三丁目2番5号 霞ヶ  
関ビルディング 酒井国際特許事務所

PCT

国際調査機関の見解書  
(法施行規則第40条の2)  
[PCT規則43の2.1]

発送日

(日.月.年)

19.7.2005

出願人又は代理人

の書類記号 PINA-17024

今後の手続きについては、下記2を参照すること。

国際出願番号

PCT/J P 2005/003558

国際出願日

(日.月.年) 24.02.2005

優先日

(日.月.年) 24.02.2004

国際特許分類 (IPC) IntCl<sup>7</sup> G06F19/00, G01N33/48, 33/566, 33/68

出願人 (氏名又は名称)

株式会社インシリコサイエンス

1. この見解書は次の内容を含む。

☒ 第I欄 見解の基礎

☐ 第II欄 優先権

☐ 第III欄 新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての見解の不作成

☐ 第IV欄 発明の単一性の欠如

☒ 第V欄 PCT規則43の2.1(a)(i)に規定する新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についての見解、それを裏付けるための文献及び説明

☐ 第VI欄 ある種の引用文献

☐ 第VII欄 国際出願の不備

☐ 第VIII欄 国際出願に対する意見

2. 今後の手続き

国際予備審査の請求がされた場合は、出願人がこの国際調査機関とは異なる国際予備審査機関を選択し、かつ、その国際予備審査機関がPCT規66.1の2(b)の規定に基づいて国際調査機関の見解書を国際予備審査機関の見解書とみなさない旨を国際事務局に通知していた場合を除いて、この見解書は国際予備審査機関の最初の見解書とみなされる。

この見解書が上記のように国際予備審査機関の見解書とみなされる場合、様式PCT/ISA/220を送付した日から3月又は優先日から22月のうちいずれか遅く満了する期限が経過するまでに、出願人は国際予備審査機関に、適当な場合は補正書とともに、答弁書を提出することができる。

さらなる選択肢は、様式PCT/ISA/220を参照すること。

3. さらなる詳細は、様式PCT/ISA/220の備考を参照すること。

見解書を作成した日

24.06.2005

名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/J P)

郵便番号100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

宮久保 博幸

電話番号 03-3581-1101 内線 3562

5 L

3 1 3 6

様式PCT/ISA/237 (表紙) (2004年1月)

## 第 I 欄 見解の基礎

1. この見解書は、下記に示す場合を除くほか、国際出願の言語を基礎として作成された。

- ☐ この見解書は、\_\_\_\_\_ 語による翻訳文を基礎として作成した。  
それは国際調査のために提出された PCT 規則 12.3 及び 23.1(b) にいう翻訳文の言語である。

2. この国際出願で開示されかつ請求の範囲に係る発明に不可欠なヌクレオチド又はアミノ酸配列に関して、以下に基づき見解書を作成した。

- a. タイプ ☐ 配列表  
☐ 配列表に関連するテーブル
- b. フォーマット ☐ 書面  
☐ コンピュータ読み取り可能な形式
- c. 提出時期 ☐ 出願時の国際出願に含まれる  
☐ この国際出願と共にコンピュータ読み取り可能な形式により提出された  
☐ 出願後に、調査のために、この国際調査機関に提出された

3. ☐ さらに、配列表又は配列表に関連するテーブルを提出した場合に、出願後に提出した配列若しくは追加して提出した配列が出願時に提出した配列と同一である旨、又は、出願時の開示を超える事項を含まない旨の陳述書の提出があった。

4. 補足意見：

第V欄 新規性、進歩性又は産業上の利用可能性についてのPCT規則43の2.1(a)(i)に定める見解、それを裏付ける文献及び説明

1. 見解

新規性 (N)	請求の範囲	1-31	有
	請求の範囲		無
進歩性 (IS)	請求の範囲	6-7, 16-17, 26-27	有
	請求の範囲	1-5, 8-15, 18-25, 28-31	無
産業上の利用可能性 (IA)	請求の範囲	1-31	有
	請求の範囲		無

2. 文献及び説明

[国際調査報告で引用された文献]

文献1 : WO 2002/057954 A1 (株式会社インシリコサイエンス) 2002.07.25, 全文, 第1-16図

文献2 : WO 1996/013785 A1 (板井昭子) 1996.05.09, 全文, 第1-4図

請求の範囲1-5, 8-15, 18-25, 28-31に係る発明は、国際調査報告で引用された文献1-2により進歩性を有しない。

文献1には、タンパク質の原子座標を基準振動解析により変位させた複数の立体構造を生成し、これらの複数の立体構造のうち1つの立体構造を選択し、リガンドとのドッキング操作を行うことが記載されている。

文献2には、タンパク質中の水素結合性官能基に対してダミー原子を設定し、ダミー原子の原子間距離とリガンドの水素結合性ヘテロ原子の原子間距離との差を用いてリガンドの配座を決定し、リガンドの構造を変化させて複合体構造を最適化し、有望なリガンドを選択することが記載されている。

文献1の「タンパク質の原子座標を基準振動解析により変位させる」構成は、請求の範囲1における「動的挙動を考慮した構造変化を行う」構成に対応する。請求の範囲1における「空間点を指定する」構成、および「相互作用関数を計算する」構成は、文献2の上記記載から当業者が容易に想到し得たものである。

請求の範囲6-7, 16-17, 26-27に係る発明は、国際調査報告で引用された各文献に対して進歩性を有する。

タンパク質座標データに対し基準振動計算を行い、各アミノ酸のゆらぎの大きさを求め、当該ゆらぎの大きさを拘束条件として、分子動力学計算を行うことは、上記文献のいずれにも記載も示唆もされていない。